Chapitre 12- Activité documentaire 2-
Formalisme des flèches courbes

Un mécanisme réactionnel rend compte, à l'échelle microscopique, de la formation, à l'échelle macroscopique, des produits à partir des réactifs. Y figurent des intermédiaires réactionnels et des catalyseurs éventuels.

Comment identifier les intermédiaires réactionnels et les catalyseurs éventuels à partir du mécanisme réactionnel ?

I. Documents mis à disposition :

Document 1 : Le benzoate d'éthyle

Le benzoate d'éthyle est l'un des principaux esters responsables du parfum de la cerise. L'équation de sa synthèse, à partir d'acide benzoique et d'éthanol s'écrit :

$$C_6H_5CO_2H(l) + C_2H_5OH(l) = C_6H_5CO_2C_2H_5(l) + H_2O(l)$$

Document 2 : Site donneur, site accepteur et étape d'un mécanisme réactionnel

Un site donneur de doublet d'électrons est un site riche en électrons (forte densité électronique).

Il peut être localisé :

-sur un atome possédant au moins un doublet non liant ;

-sur un atome porteur d'une charge électrique négative (entière ou partielle) ;

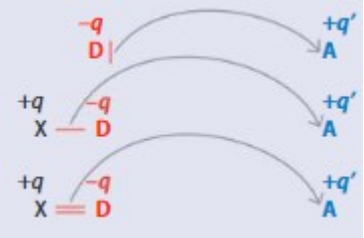
-entre deux atomes engagés dans une liaison multiple.

Un site accepteur de doublet d'électrons est un site pauvre en électrons (faible densité électronique).

Il peut être localisé :

-sur un atome porteur d'une charge électrique positive (entière ou partielle) ;

-sur un atome porteur d'une lacune électronique.



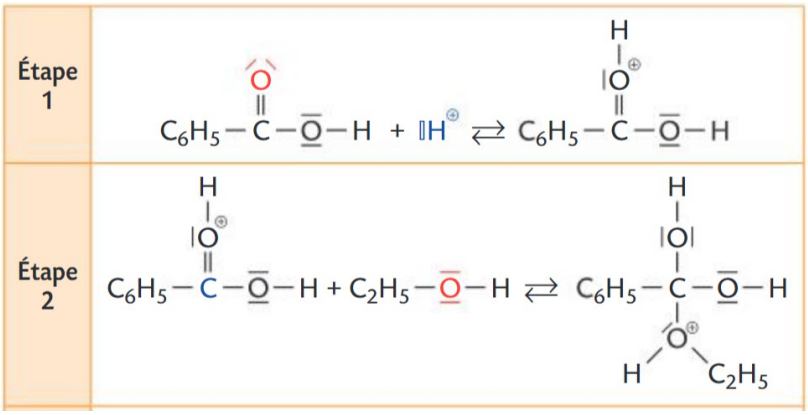
Chaque étape d'un mécanisme réactionnel résulte de l'interaction entre un site donneur et un site accepteur de doublet d'électrons. Il se produit alors un transfert de doublet d'électrons : ce transfert est modélisé par une flèche courbe orientée vers le site accepteur.

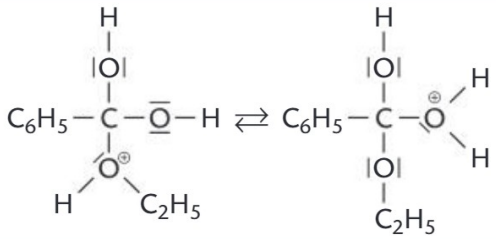
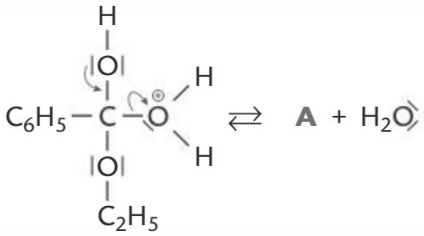
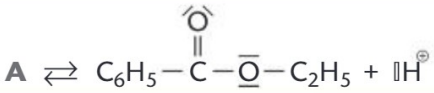
Attention :

-chaque flèche représente le mouvement d'un seul doublet ;

-au cours d'une même étape, il est possible que plusieurs doublets se déplacent afin de respecter la règle de l'octet. Il faut alors représenter le mouvement de tous les doublets.

Document 3 : Mécanisme de synthèse du benzoate d'éthyle



Étape 3	
Étape 4	
Étape 5	

Données : électronégativités : $\chi(H) = 2,2$; $\chi(C) = 2,5$; $\chi(O) = 3,4$; liaison C-H non polarisée.

II. Questions :

1-a) Dans les entités de chacune des deux premières étapes du document 3, justifier :

-que les atomes repérés en rouge sont des sites donneurs de doublet d'électrons ;

-que l'atome et l'ion repéré en bleu sont des sites accepteurs de doublet d'électrons.

1-b) Compléter les trois premières étapes du mécanisme en représentant, par des flèches courbes, le transfert des doublets d'électrons permettant d'expliquer la formation des entités produites.

1-c) Compléter l'équation de l'étape 4 en écrivant le schéma de Lewis de l'entité A.

1-d) Recopier l'équation de l'étape 5, puis la compléter en intégrant le schéma de Lewis de l'entité A et en représentant la flèche courbe permettant de justifier l'obtention des entités produites.

2-Citer deux raisons qui laissent à penser que les ions hydrogènes H^+ catalysent la réaction et identifier deux intermédiaires réactionnels de votre choix.

3-Conclure : expliquer comment :

3-a) établir, à partir du mécanisme réactionnel, l'équation globale d'une réaction ;

3-b) différencier, à partir du mécanisme réactionnel, un catalyseur d'un intermédiaire réactionnel.